

多角的におい分析ソリューション



図1 におい分析で用いられる装置と分析が実施されている分野
(質量分析計を製造・販売する大手7社の装置別と分野別の資料発行状況)



データベース

Smart Aroma Database™

Smart Aroma Database は、食品や飲料などで重要な香気成分の分析に必要な情報を登録しており、GC-MS(/MS)を用いた香気分析をトータルでサポートします。500 成分以上の分析情報（MRM と SIM モード）や化合物情報が登録されており、保持時間、特徴的なイオンおよびマススペクトル情報を利用して、確実かつ簡便に検出することが可能です。登録化合物には官能情報も登録されており、検出化合物の半定量値算出機能を合わせることで、香気に寄与する化合物の解析に活用できます。



Product >

異臭分析システム

過去の異臭問題で特定された原因物質を登録しており、異臭成分の官能情報や臭気閾値が収録された GC-MS(/MS)用のデータベースです。消毒臭、カビ臭、樹脂臭、塗装臭などの異臭分析は標準試薬なしで簡易定量が可能で、MRM や SIM を用いて臭気閾値の低い成分でも確実に検出します。また、におい嗅ぎ装置に対応しており、保持時間予測表示機能を組み合わせて利用することにより、異臭原因物質の特定を行うことができます。



Product >

統計解析ソフトウェア

マルチオミクス解析パッケージ

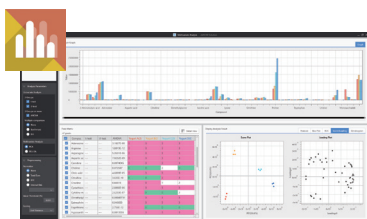


2 群比較でボルケーノプロットによりマーカー探索したい方、白地図による経時変化可視化や相関解析を実施したい方におすすめします。PCA、階級クラスター解析、ボックスプロットの他に、p 値だけでなく 2 群間の面積比も考慮してマーカー探索可能なボルケーノプロットと、白地図上で相関解析が可能な機能が搭載されています。統計機能に関しては、マルチオミクスや質量分析データに限らず対応が可能です（例：製造日からの日数や湿度、室温などのメタデータ）。



Product >

eMSTAT Solution™



PCA で分離しない試料をお持ちの方、2 群以上の試料群間でマーカー化合物を検索したい方、未知試料を判別したい方におすすめします。PCA、階級クラスター解析、t 検定、ボックスプロットの他に、3 群以上の試料群間の各化合物の p 値を計算し、統計的に差異のある化合物（マーカー候補）を検出する分散分析（ANOVA）、PCA より試料群を分けやすい部分的最小二乗判別分析（PLS-DA）、未知試料を 2 群の試料群のどちらに属するか判別可能な SVM、未知試料を 2 群以上の試料群のどれに属するか判別可能なランダムフォレストなどが搭載されています。



Product >

官能評価とにおいの統合解析例 緑茶のにおい成分分析



Application >

当社は、国立研究開発法人 農業・食品産業技術総合研究機構と連携して、「食」の機能性成分解析を目的とした共同研究により、農産物や食品に含まれる機能性成分や香り成分の簡便で迅速かつ正確な分析手法の開発を行っています。今回は10種類の異なる緑茶に関して、同じ条件で粉碎後に官能評価を行いました。その後、緑茶の香り成分をSPME Arrowで抽出し、GC-MSで分析しました。



緑茶の香り成分と官能評価試験の結果から、緑茶の良い香りに関係する化合物を絞り込むことができます。

■ 分析

粉碎した緑茶と水をSPME用バイアルに封入し、SPME Arrowで濃縮して測定するAOC-6000 Plus + GCMS-QP2020 NXで分析しました。分析条件はSmart Aroma Databaseに準拠しました。

Smart Aroma Databaseは、香りに関連する約500成分以上が登録されており、効率的に香り成分の分析・解析ができます。GC-MSで定性された73の香り成分の面積値から、官能評価スコアを予測するPLS (Partial Least Squares) 回帰モデルを作成しました。予測される官能評価スコアを横軸に、実際の官能評価スコアを縦軸に示したものを図2に示します。また、PLS回帰モデルから官能評価に大きく影響する香り成分を推定した結果を表1に示します。

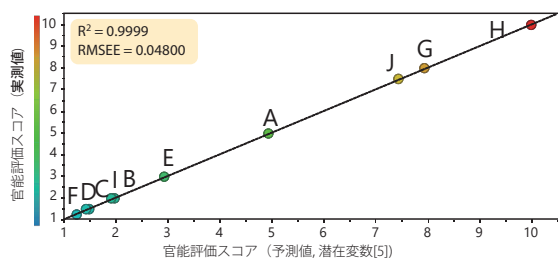


図2 PLSによる緑茶の予測官能評価スコアと実際の官能評価スコアの関係性

■ 試料

10種類の異なる緑茶

■ 使用装置

GC-MS System : GCMS-QP2020 NX
Autosampler : AOC-6000 Plus

表1 官能評価の高い緑茶に関連する成分

化合物	においの質	VIP 値
(E)-2-Pentenal	strawberry, fruit, tomato	1.799
Methyl jasmonate	jasmine	1.544
Stearyl alcohol	oil	1.529
1-Dodecanol	fat, wax	1.481
Benzaldehyde	almond, burnt sugar	1.476
Phenylacetaldehyde	hawthorne, honey, sweet	1.454
(E)-Nerolidol	wax	1.416

■ まとめ

前処理として香り成分の高濃縮が可能なSPME Arrowと、香り成分の効率的な検出が可能なSmart Aroma Databaseを組み合わせて分析を行うことで、緑茶から73成分の香り成分を同定しました。また、得られた結果と官能評価の結果を合わせてPLS解析することで、官能評価に関係する香り成分を推定することができました。

シングル四重極ガスクロマトグラフ質量分析計 GCMS-QP2020 NX

高感度化とオペレーションコスト低減を両立しており、高感度かつ長期にわたり安定した香り成分分析を実現します。



Product >

におい嗅ぎ装置を用いた官能評価とにおいの統合解析例 アロマオイルのにおい成分分析



Application >

アロマオイルは植物由来の香料・精油で、原材料によりそれぞれ特有のにおいがあります。このようなにおいの評価には官能試験がよく用いられますが、人の鼻で感覚的ににおいの情報を得るため、評価が主観的になってしまいます。そこで、官能評価の情報とGC-MSなどの機器分析を組み合わせることにより、客観的ににおいの評価を可能にします。



- シリカモノリス捕集材MonoTrap®を使用することで、香氣成分を簡単に分析することができます。
- 加熱脱着装置TD-30Rのリコレクト機能で、一度サンプリングした試料の繰り返し測定が可能です。
- GC-MSとにおい嗅ぎ装置を組み合わせることで、機器測定の結果と官能評価の比較が可能です。

■ 分析

市販の3種アロマオイルを10 %エタノール水溶液で希釈し、0.1 % アロマオイル溶液を準備しました。0.1 % アロマオイル溶液1 mLをそれぞれ20 mLバイアルに添加しました。アロマオイルを添加したバイアルのキャップにMT Holder (GL Sciences Inc., P/N : 1050-79003) を用いて、MonoTrap RGC18 TD (GL Sciences Inc., P/N : 1050-74201) を固定しセットしました。恒温ヒーターを用いて40 °Cで30分間保温し、アロマオイルから発生する香氣成分をMonoTrapに捕集しました。その後、MonoTrapを加熱脱着用捕集管に入れ、分析しました。

■ 試料

市販の3種アロマオイル（ローズ、ジャスミン、シトラス）

■ 使用装置

GC-MS System	: GCMS-QP2020 NX
TD System	: TD-30R
Sniffing Port	: OP275 Pro II (GL Sciences Inc.)

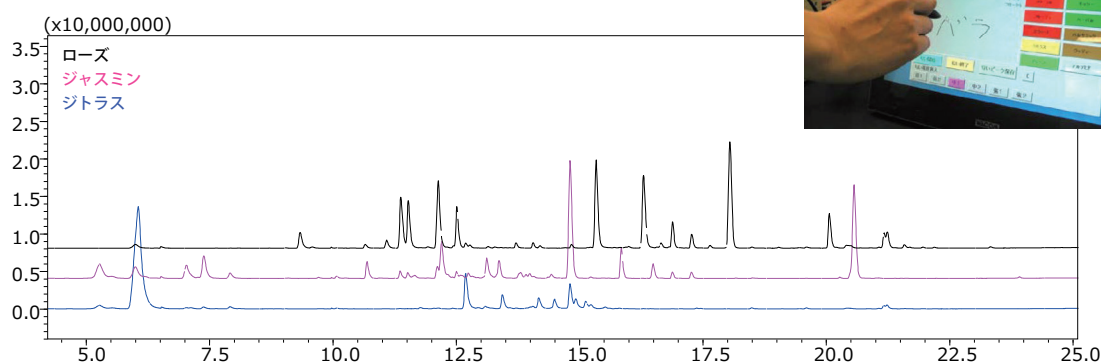


図3 3種アロマオイルのTICクロマトグラム(左)とスニッフィングポートで感じたにおい官能情報の記録(右上)

■ まとめ

本稿では、香氣成分をMonoTrapで捕集し、TD-30R + GCMS-QP2020 NXで分析することで、3種のアロマオイルから発生する香氣成分を簡単に分析することができました。また、検出された成分のにおいの質をAroChemBase(アルファ・モス・ジャパン)で検索することで、においの質を比較・確認することができました。GC-MSの結果にスニッフィングポートと、におい嗅ぎ手書きソフトウェアを組み合わせることで、官能評価と機器測定の結果を比較することができます。

サーマルデソープションシステム TD-30 シリーズ

120検体を搭載できるサンプルキャパシティを持ち、前の試料を測定している間に次の試料の前処理を開始するオーバーラップ機能により、効率的な香氣成分分析を実現します。



Product >

食品の栄養素・味成分とにの統合解析例 代替食品開発に活かすデータ解析



Application >

高級食材やアレルギー食材の代用として、代替食品は高いニーズがあります。また近年、食料生産における環境負荷の低減や健康意識の向上を背景として、その市場はさらに拡大しています。代替食品には、カニを模したカニかまぼこ（カニカマ）、ビールを模した発泡酒、牛肉を模した大豆肉や培養肉などがあります。代替食品の一例であるカニカマを題材として、成分データを活用した代替食品開発の手法を提案します。



- Smart Metabolites DatabaseおよびSmart Aroma Databaseを用いることで、食品中の幅広い成分を効率よく解析できます。
- 成分データと官能評価データとの統合解析により、食品の味やにおいのデザインをサポートします。

■ 分析

代謝物測定の前処理は、サンプル100 mgを秤量した後、水、メタノール、クロロホルムの混合溶液を用いて代謝物抽出およびタンパク質や脂質の除去を行いました。さらに、GC-MSは気化したサンプルの分析に適しているため、難揮発性代謝物を気化しやすい状態にするための誘導体化を行いました。誘導体化試薬としてメトキシアミンと *N*-トリメチルシリルトリフルオロアセトアミド（MSTFA）を用いました。香気成分分析はサンプル2 gを20 mLバイアルに移し、SPME Arrowを用いてヘッドスペース部の香気成分を捕集しました。多機能オートサンプリングシステム AOC-6000 Plusを用いて、バイアル加温、抽出、試料導入を自動で行いました。

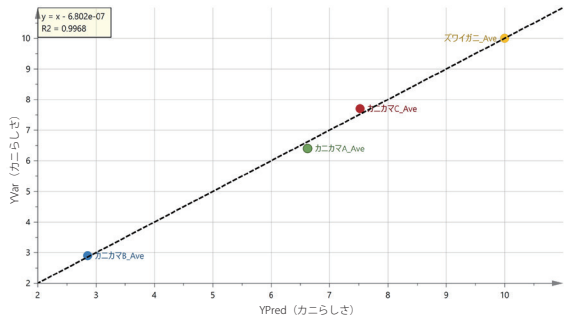


図 4 説明変数を成分データ、目的変数を官能評価データとしたPLS回帰

■ 試料

代替食品カニカマ（製品 A、B、C）と本物食品ズワイガニ

■ 使用装置

GC-MS System : GCMS-TQ8050 NX
Autosampler : AOC-6000 Plus

表 2 カニらしさに高い相関を持った成分

カニらしさに正に相関する成分		
成分名	VIP 値	分類
Dodecanal	1.14	Aroma
Stearic acid-TMS	1.20	Metabolites
Phosphoric acid-3TMS	1.24	Metabolites
Threonine-3TMS	1.32	Metabolites
カニらしさに負に相関する成分		
成分名	VIP 値	分類
Ethyl palmitate	1.34	Aroma
Glutamic acid-3TMS	1.34	Metabolites
2-Phenylethanol	1.29	Aroma
Ethyl octanoate	1.26	Aroma

■ まとめ

味や香りが本物の食品に近い代替食品を開発することを想定して、GC-MSによる成分分析と多変量解析を利用する方法をご紹介しました。味に関連する成分は Smart Metabolites Databaseを、香りに関連する成分は Smart Aroma Databaseを使用して分析メソッドを作成しました。複数種の製品サンプルの成分データや官能評価データを活用することで、どの成分が本物らしさの構成に寄与するかを調査することができました。

Smart Metabolites Database™ Ver. 2

約600成分の一次代謝物が分析対象化合物として登録されており、メソッドを最適化する必要がなく、代謝物分析の大幅な効率化が図れます。



Product >

空間率(充填度)とにおける関係観察例 紙巻煙草の成分分析



Application >

官能評価は時間とコストがかかるうえに主観的な要素が含まれており、結果が環境や状況に影響されます。そのため、客観的な評価方法を確立することが求められています。紙巻煙草の刻み葉の充填度とにおいては密接に関連しており、統合解析によりこれらの要素の関連性を解明することで紙巻煙草の品質向上や新たな製造方法の開発につながります。



- 統計ソフトウェア「マルチオミクス解析パッケージ」を用いることで、GC-MS、X線CTシステム、官能評価の統合解析が可能です。
- Smart Aroma Databaseと異臭分析データベースは、同一のカラムおよび装置システムを用いて分析でき、保持指標や最適化されたMRMトランジションだけでなく、官能情報（例：甘い、ナッツ臭など）も収載されています。

■ 分析

X線CTシステムによる充填度解析は、CT撮影によってボリュームデータを取得し、グレースケール値を閾値で仕分けすることで、葉（巻紙を含む）と空気を分離しました。領域を作成するため煙草の葉部を円筒形状（ $\Phi 4.6 \times 60$ mm）で囲みしました。このとき、先端から10 mmの間隔で6区画に小分けします。その後、各領域における“葉”の画素数を数えることで各領域（ $\Phi 4.6 \times 10$ mm）の体積%を算出しました。

GC-MS による成分分析に際しては、巻紙をほどこ、中に含まれる葉を固相マイクロ抽出用バイアルに500 mg（各銘柄の紙巻煙草3本、n=3）秤量しました。

■ 試料

市販の3つの異なる煙草銘柄の紙巻煙草

■ 使用装置

GC-MS System : GCMS-TQ8040 NX
NDI System : XSeeker 8000

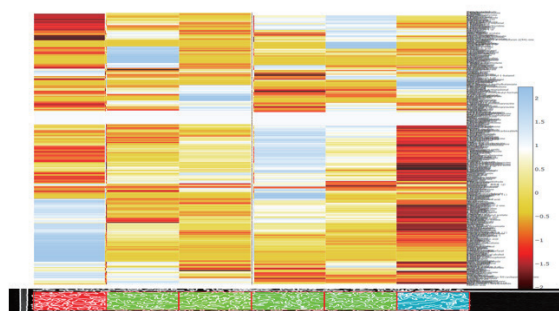


図5 紙巻煙草2の充填度とにおける成分の関連性
(横軸 煙草の充填度、縦軸 成分)

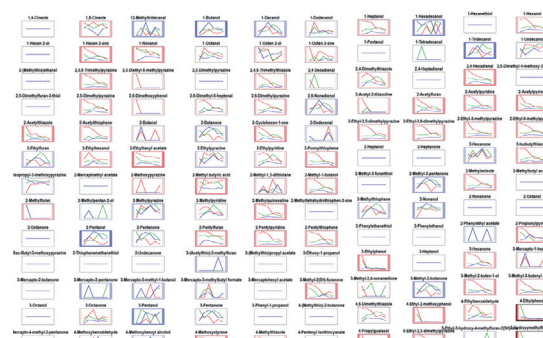


図6 紙巻煙草1～3の充填度とにおける成分の関連性

■ まとめ

本報では、3つの異なる紙巻煙草の刻み葉と着火後のガス試料を、ガスクロマトグラフ質量分析計 GCMS-TQ8040 NXと卓上X線CTシステム XSeeker 8000および官能評価を用いて、多角的に評価しました。X線CTシステムによる充填度測定値と、GC-MSにより検出された295成分および官能評価値をマルチオミクス解析パッケージにより主成分分析、階級クラスタ解析、ボルケーノプロット解析、相関分析などで統合解析し、各銘柄や充填度で特徴的な成分を検出することができました。

卓上X線CTシステム XSeeker™ 8000

パンやアイスクリームなど食品の空気（空間）率だけでなく、160 kVの高出力機能を活かし、X線透過しにくい肉厚な樹脂部品も観察可能です。観察開始までの工程はわずか3ステップで、アイスクリームは溶けないうちに、パンは焼き立てのうちに測定が可能です。



Product >

におい発生源からの距離や経過時間の比較例 芳香剤のにおい成分分析



Application >

効果が長期間持続する芳香剤、殺虫剤、防かび剤などは便利な一方、アレルゲンや発がん性のある有害物質の存在や近隣住宅からのにおいによるトラブルが「香害」として社会問題になっています。本稿では、市販のハンガー型芳香剤から発生するにおい成分の経時変化を異なる距離で3日間観測しました。



日間変動や距離によるにおい成分の相対定量変化を確認できます。

■ 分析

換気されている部屋（約 20 m²）の壁側にあるハンガー掛けに、市販のハンガー型芳香剤を装着しました。Radiello（Restek、P/N：RAD147）をパッシブサンプラーとして製品から 0、1、2 m 地点に固定し、毎日 15 時間捕集を 3 日間続けました。捕集した後、RadielloはHS-20用の20 mLバイアルの中に封入され、加熱脱着によりHS-20 TrapとGCMS-QP2020 NXで分析に供されました。また、個人暴露評価のためにRadielloを8時間首に装着して事務作業を行い、同様に加熱脱着で測定しました。

■ 試料

市販のハンガー型芳香剤

■ 使用装置

GC-MS System : GCMS-QP2020 NX
HS : HS-20 Trap

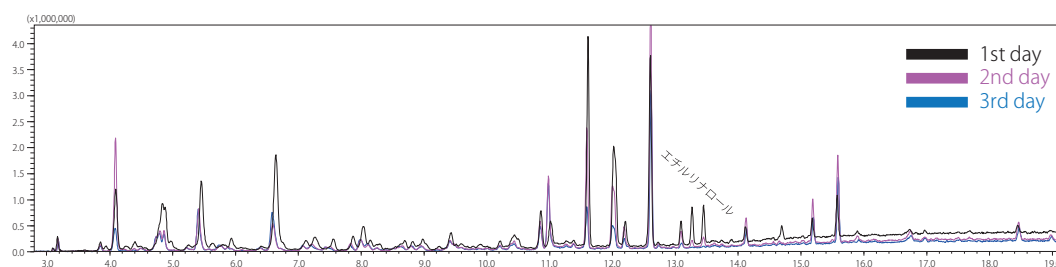


図 7 0 m地点における強度変化

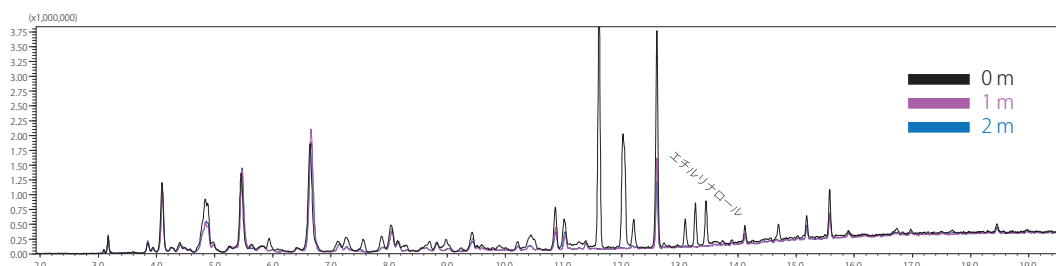


図 8 1 日目の強度変化

■ まとめ

ハンガー型芳香剤は、継続してその効果が得られることから非常に便利な商品です。本報では、ハンガー型芳香剤をHS-20 TrapとGCMS-QP2020 NXを用いて分析しました。パッシブサンプラー Radielloを用いて 3 日間の日間変動を確認したところ、距離や時間に影響を受けやすい化合物があることが分かりました。また、人体へのにおい成分の暴露も評価し、製品の特徴を知ることができました。

ヘッドスペースサンブラ HS-20 NX シリーズ

トラップ機能を搭載しており、高感度な香気成分分析を実現します。また、インターフェースが装置に内蔵されており、コールドスポットが無く安定した分析を実現します。



Product >

におい成分とその前駆体の統合解析例

牛肉中のグリコーゲン含有量とにおい成分分析



Application >

年間1,900頭前後（全国の0.7%）のみ出荷される非常に希少価値の高い鳥取和牛61頭の牛肉を、ガスクロマトグラフ質量分析計（GCMS-TQ8040 NX）や紫外可視分光光度計（UV-1280）などを用いて多角的に評価し、eMSTAT Solutionにより農家別や血統別でブランド指標となり得る成分を探索しました。



- GC-MS測定にSmart Metabolites DatabaseやSmart Aroma Databaseを用いることで、簡便に一次代謝物や香り成分の試料間比較が可能です。
- UVでグリコーゲン、GC-MSでグリコーゲン由来の分解物を測定し、統合解析することが可能です。

■ 分析

GCMS-TQ8040 NXとSmart Metabolites Database Ver. 2を用いて、有機酸、糖、核酸、脂肪酸、アミノ酸などの一次代謝物488成分を測定しました。また、Smart Aroma Databaseを用いて、SPME Arrowにより40℃での生鮮香り成分476成分を測定しました。399成分の一次代謝物と170成分の生鮮香り成分が検出されました。

UV-1280を用いて、ヨウ素結合分析法によりグリコーゲン含有量を測定しました。また、食肉脂質測定装置によりオレイン酸と一価不飽和脂肪酸、マイクロ波乾燥式水分計を用いて、粗脂肪含量、粗蛋白含量、水分含量を測定しました。

目視評価で牛肉の色（BCS：Beef Color Standard）、脂肪交雑の度合い（BMS：Beef Marbling Standard）、牛脂肪色基準（BFS：Beef Fat Standard）、ロース芯面積、バラの厚さ、皮下脂肪の厚さ、歩留等級、肉質等級などを判別しました。

生鮮香り成分：2-アセチルピリジン（U検定値0.029）

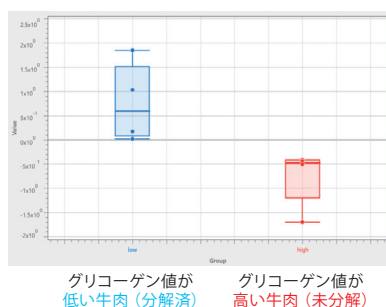


図9 グリコーゲン由来成分のU検定結果

■ 試料

和牛61頭の牛肉

■ 使用装置

GC-MS System : GCMS-TQ8040 NX
UV System : UV-1280

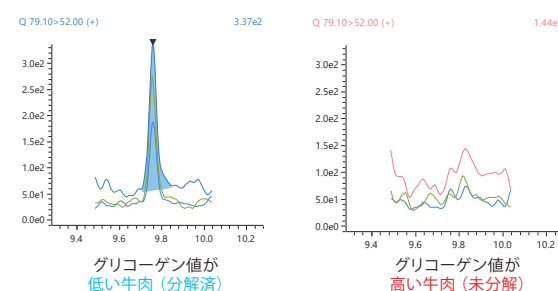
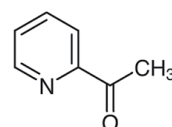


図10 2-アセチルピリジンの構造式（上）とクロマトグラム（下）

■ まとめ

UVでグリコーゲン、GC-MSでにおい成分を測定することで、グリコーゲンが低い牛肉にプロリンとグリコーゲンの分解物であるグルコースにより生成される香り成分2-アセチルピリジンが統計的に有意な高濃度で存在することが確認されました。ピルビン酸と2-アセチルピリジンのどちらもグリコーゲン含有量が低い牛肉で高く検出されており、グリコーゲンの分解が進んだ、または元のグリコーゲン含量が低かった可能性が示唆されました。

統計解析ソフトウェア eMSTAT Solution

LC-MS、GC-MS、MALDIなどのデータに対応しており、多変量解析だけでなく未知試料を判別するSVMやランダムフォレスト機能も備えたソフトウェアです。



Product >



Smart Aroma Database、eMSTAT Solution、GCMS、GCMS-QP、GCMS-TQ、Smart Metabolites DatabaseおよびXSeekerは、株式会社島津製作所またはその関係会社の日本およびその他の国における商標です。

MonoTrapは、ジエールサイエンス株式会社の登録商標です。

本文書に記載されている会社名、製品名、サービスマークおよびロゴは、各社の商標および登録商標です。

なお、本文中では「TM」、「®」を明記していない場合があります。

本製品は、医薬品医療機器法に基づく医療機器として承認・認証等を受けておりません。

治療診断目的およびその手続き上での使用はできません。

トラブル解消のため補修用部品・消耗品は純正部品をご採用ください。

外観および仕様は、改良のため予告なく変更することがありますのでご了承ください。

株式会社 島津製作所

分析計測事業部

604-8511 京都市中京区西ノ京桑原町1

製品情報



価格お問合せ



東京支社 (官公庁担当) (03) 3219-5631
(大学担当) (03) 3219-5616
(会社担当) (03) 3219-5622

関西支社 (06) 4797-7230
札幌支店 (011) 700-6605
東北支店 (022) 221-6231
郡山営業所 (024) 939-3790

つくば支店 (官公庁・大学担当) (029) 851-8511
(会社担当) (029) 851-8515
北関東支店 (官公庁・大学担当) (048) 646-0095
(会社担当) (048) 646-0081

横浜支店 (官公庁・大学担当) (045) 311-4106
(会社担当) (045) 311-4615
静岡支店 (054) 285-0124

名古屋支店 (官公庁・大学担当) (052) 565-7521
(会社担当) (052) 565-7531
京都支店 (官公庁・大学担当) (075) 823-1604
(会社担当) (075) 823-1603

神戸支店 (078) 331-9665
岡山営業所 (086) 221-2511
四国支店 (087) 823-6623

広島支店 (082) 236-9652
九州支店 (官公庁・大学担当) (092) 283-3332
(会社担当) (092) 283-3334

島津コールセンター ☎ 0120-131691
(操作・分析に関する相談窓口) IP電話等: (075) 813-1691